

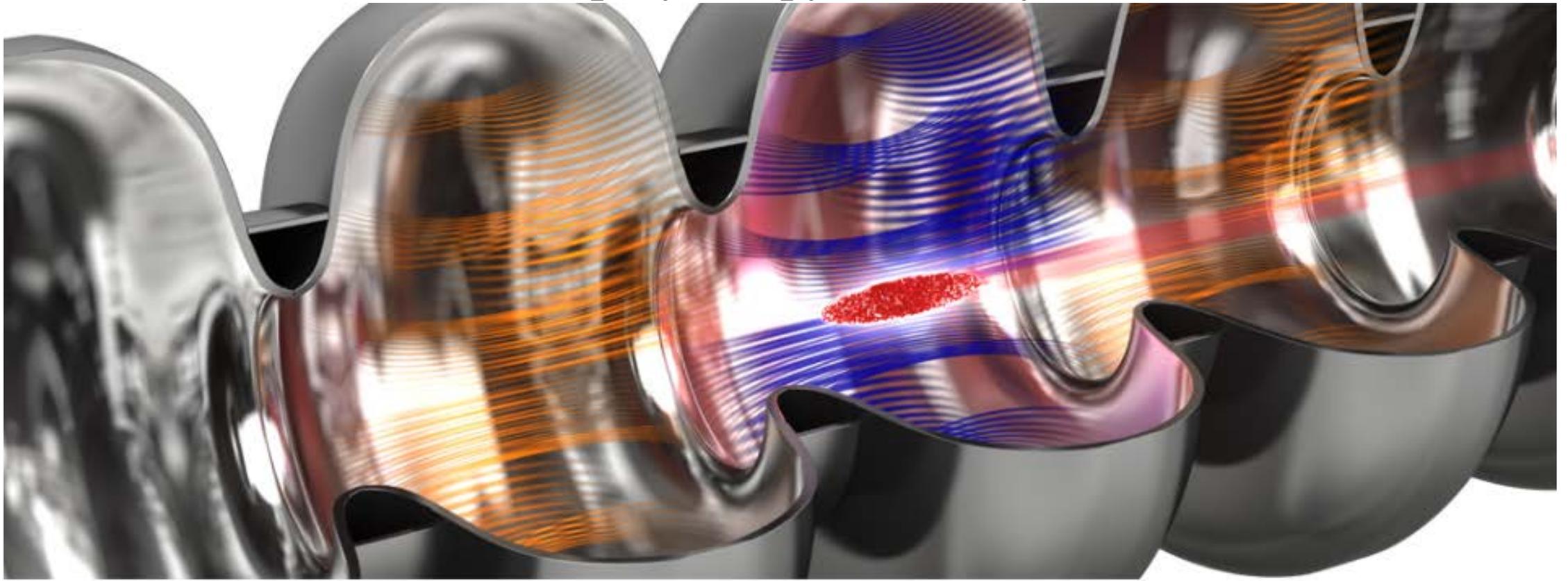
# **КУЛОНОВСКИЙ ВЗРЫВ ТРЕХАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ**

Докладчик: студент 413 гр. ФФ МГУ С.З. Пирчхадзе

Научный руководитель: д.ф.-м.н. в.н.с. НИИЯФ МГУ А.Н. Грум-Гржимайло

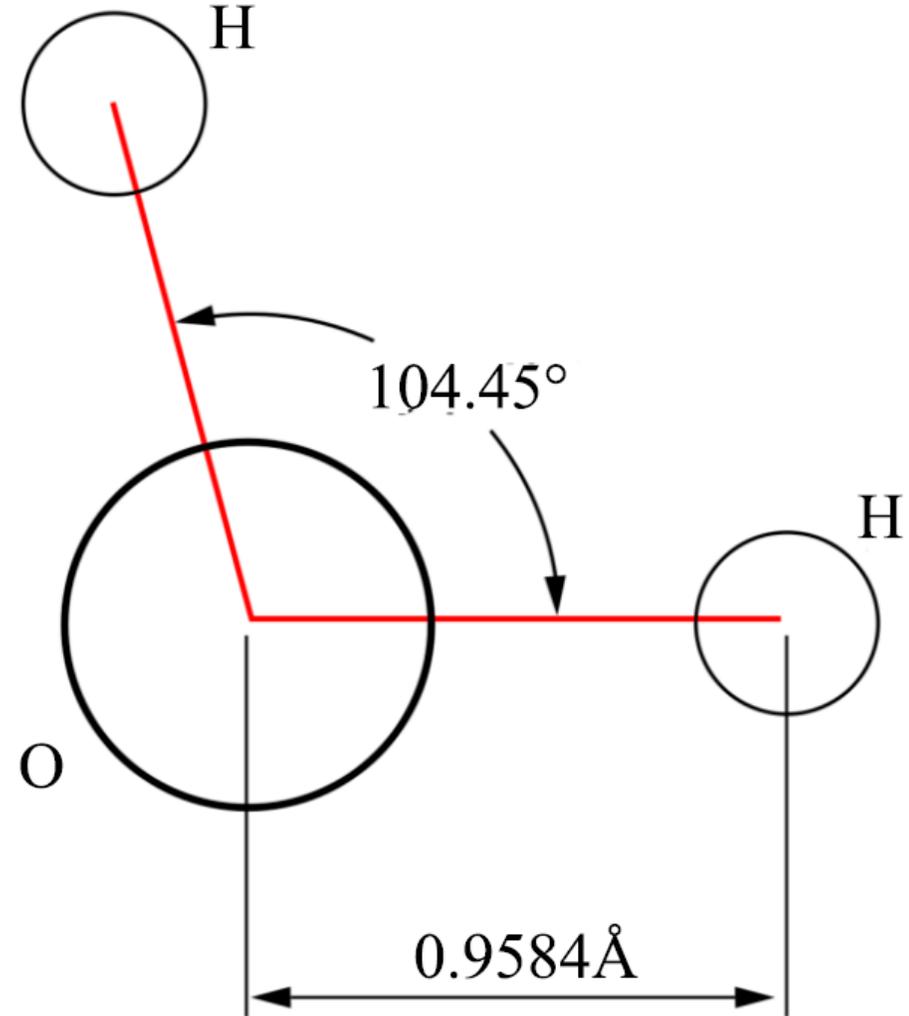
# XFEL – X-ray Free-Electron Laser

- XFEL генерирует вспышки с частотой до 27000 раз в секунду
- Длительность импульсов порядка 10-30 фемтосекунд
- Высокая интенсивность результирующего пучка



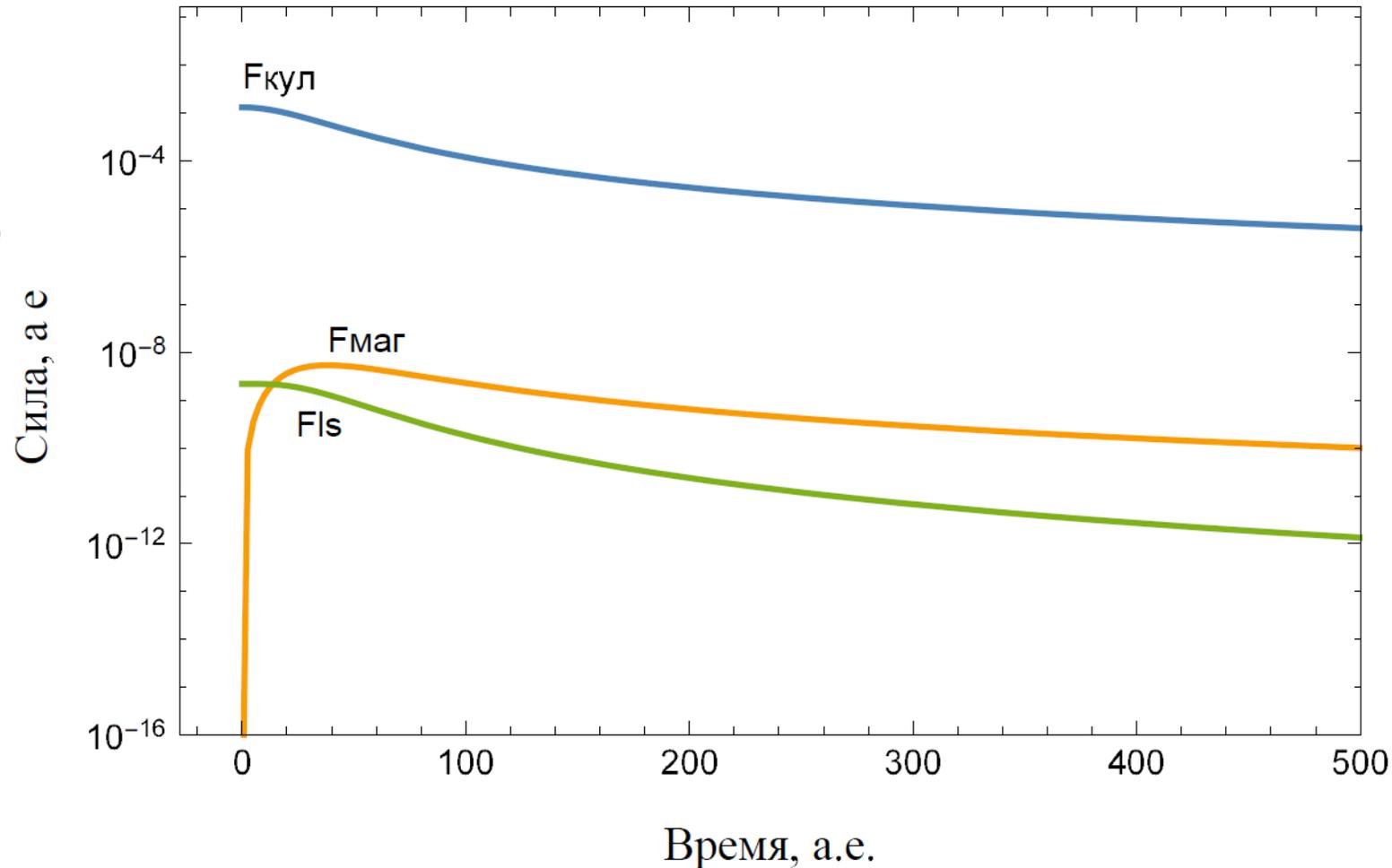
# Молекула воды

- Угол раствора  $104.45^\circ$
- Расстояние между Н и О  $\sim 0.1$  нм
- Заряды ядер Н и О  $Z_{\text{H}} = 1$  и  $Z_{\text{O}} = 8$  соответственно



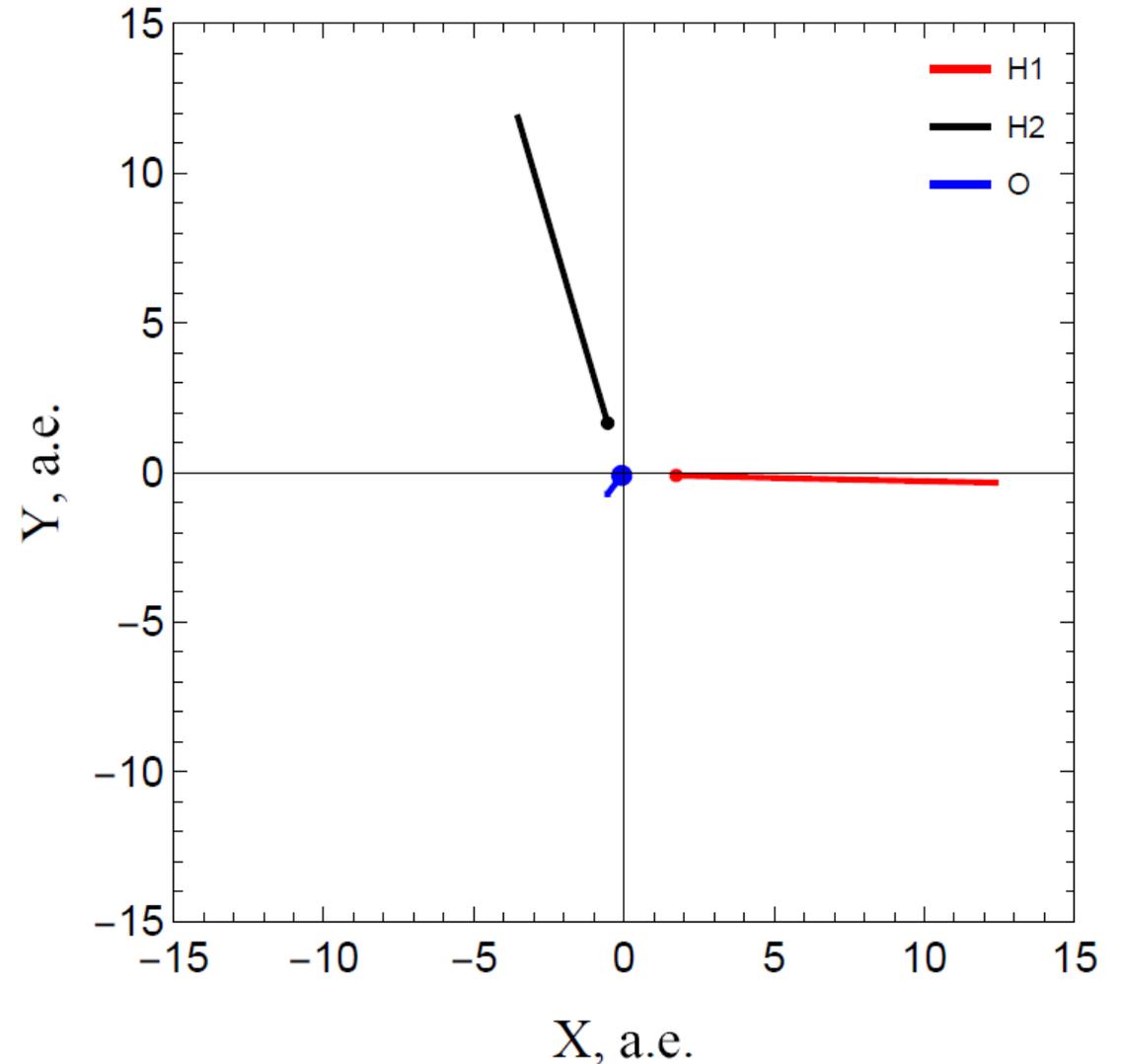
# Сравнение действующих сил

- Сила кулоновского взаимодействия  $F_{\text{кул}}$  больше сил магнитного  $F_{\text{маг}}$  и спин-орбитального  $F_{\text{ls}}$  взаимодействий примерно на 5-7 порядков
- График построен для сил, действующих на один протон со стороны кислорода



# Траектории разлета частиц

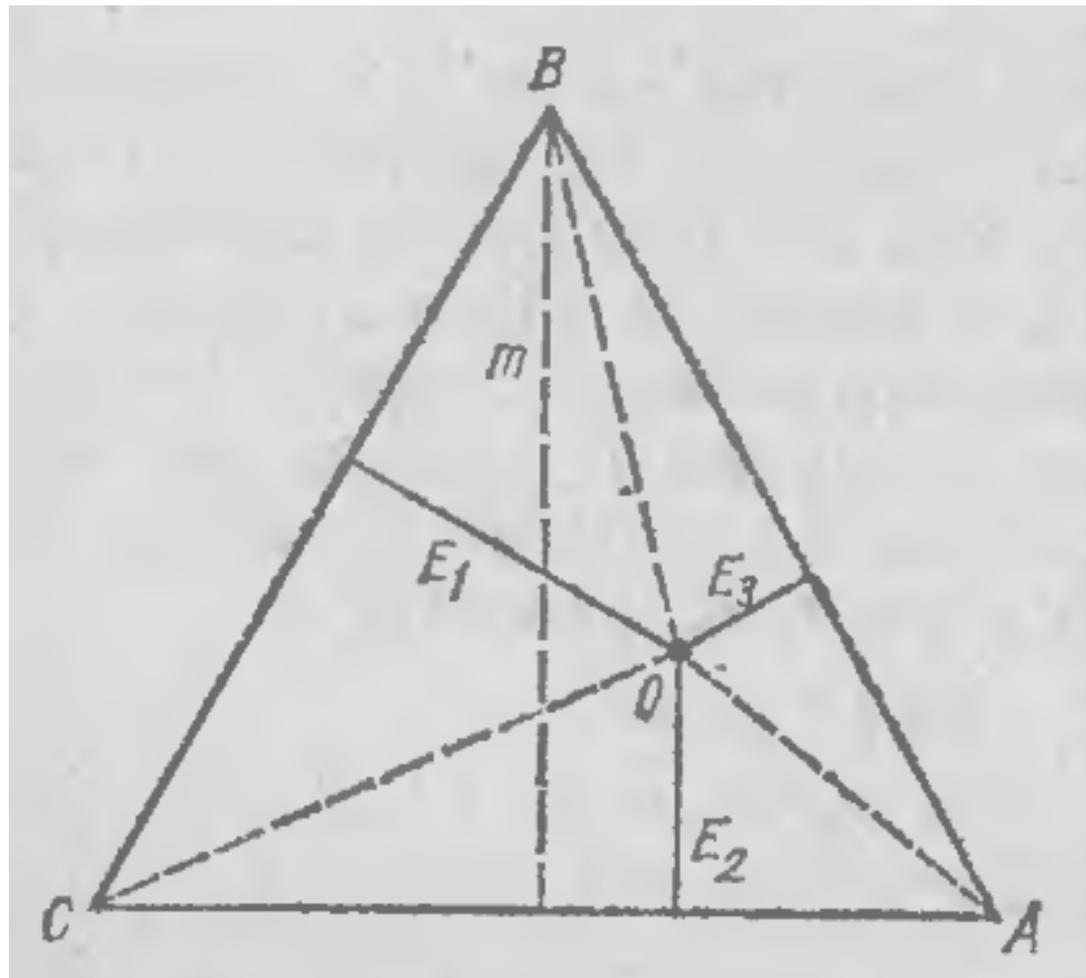
- Все расчеты ведутся в системе центра масс
- Траектории разлета частиц практически прямолинейны и лежат в одной плоскости
- Пример для разлета фрагментов на интервале 5 фс



# Диаграмма Далица

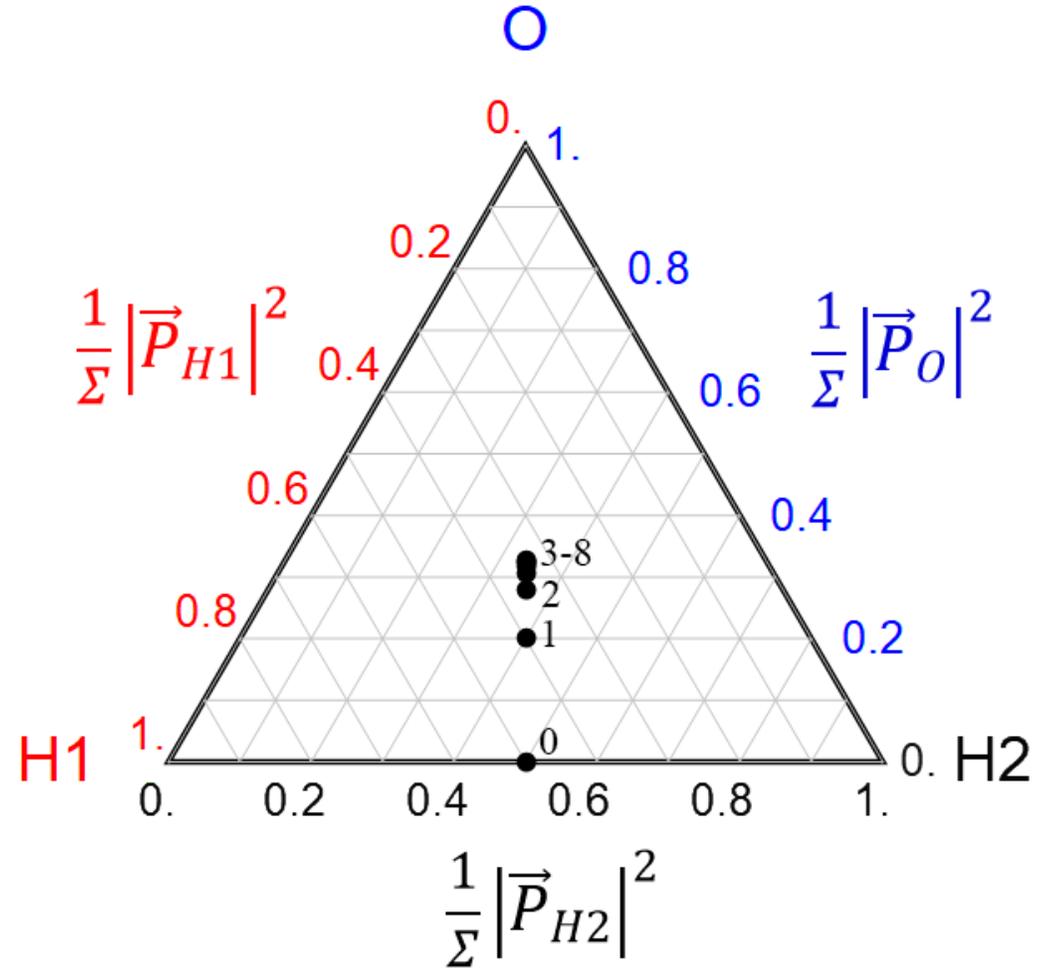
- При распаде одной частицы на три новых выполняются следующие законы сохранения:

$$\begin{cases} E_1 + E_2 + E_3 = m \\ \vec{P}_1 + \vec{P}_2 + \vec{P}_3 = 0 \end{cases}$$



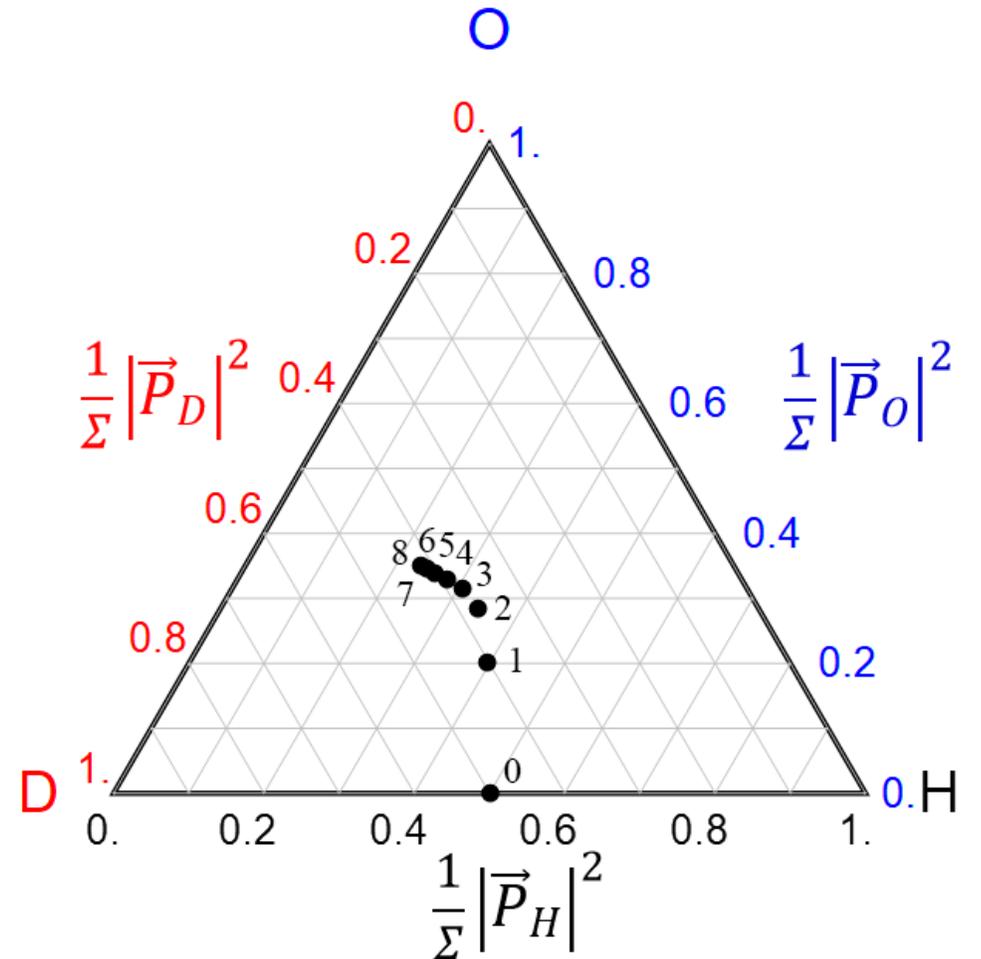
# Решение для фиксированных зарядов ионов $\text{H}_2\text{O}$

- В рамках классической механики и в отсутствие каких-либо внешних взаимодействий точки на диаграмме выстраиваются в линию, так как импульсы протонов по модулю оказываются равны
- Показана зависимость от заряда иона O
- $\Sigma = \sum_i |\vec{P}_i|^2$ , где  $i=0,1,2$



# Решение для фиксированных зарядов ионов HDO

- Так как масса D больше массы H примерно в 2 раза, первый забирает большую часть импульса при разлете. Это становится более заметно с увеличением заряда иона O
- Показана зависимость от заряда иона O
- $\Sigma = \sum_i |\vec{P}_i|^2$ , где  $i=0,1,2$

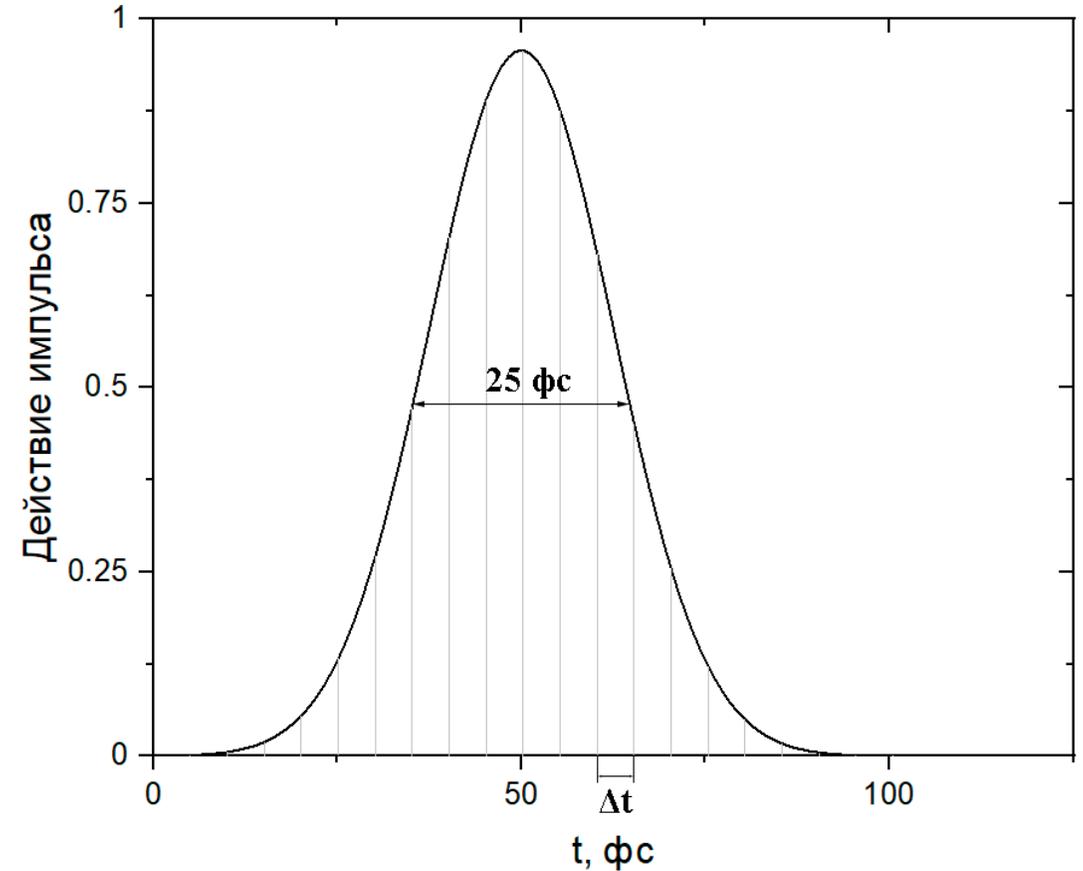


# Последовательная ионизация атомов в молекуле $\text{H}_2\text{O}$

- При облучении атомов водорода происходит фотоионизация, а атомов кислорода – фотоионизация, флуоресценция и оже-эффект
- Для нахождения зависящей от времени вероятности заселения конфигурации  $I$  решаются скоростные уравнения

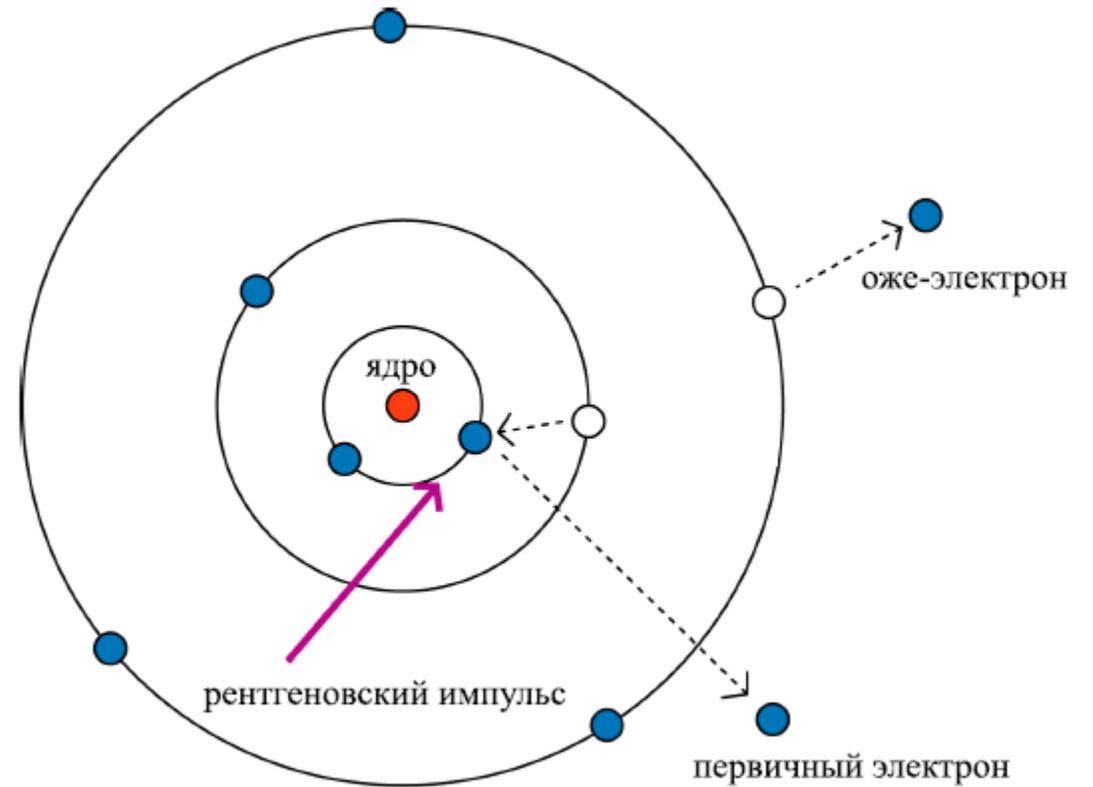
$$\frac{d}{dt}P_I(t) = \sum_{I' \neq I}^{\text{all conf.}} [\Gamma_{I' \rightarrow I} P_{I'}(t) - \Gamma_{I \rightarrow I'} P_I(t)]$$

где  $\Gamma_{I' \rightarrow I}$  скорость перехода из конфигурации  $I$  в конфигурацию  $I'$



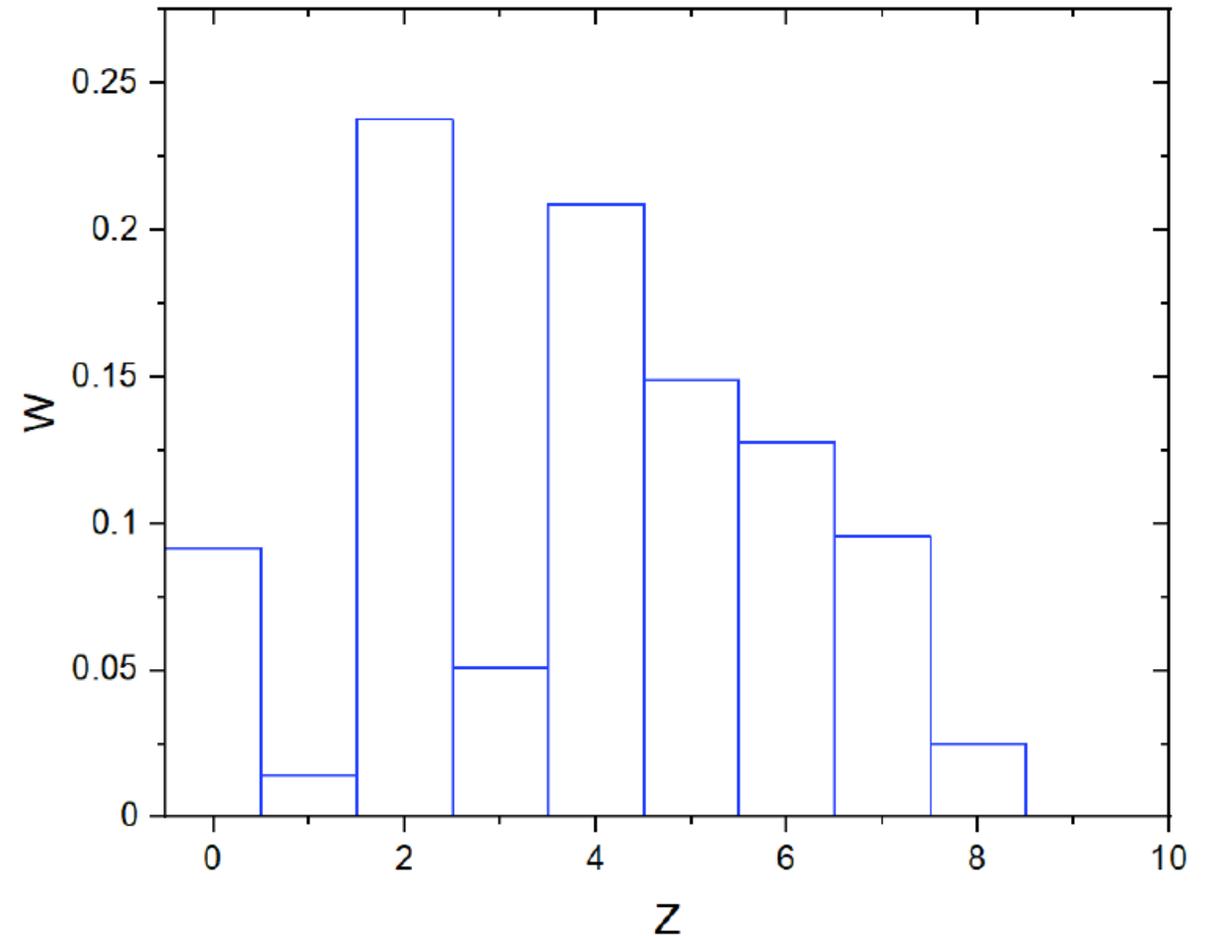
# Оже-эффект и флуоресценция

- При поглощении атомом кислорода рентгеновского кванта образуется вакансия, которая может быть заполнена электроном из другой оболочки
- Эта энергия может быть излучена в виде кванта (флуоресценция), или передана другому электрону (оже-эффект)



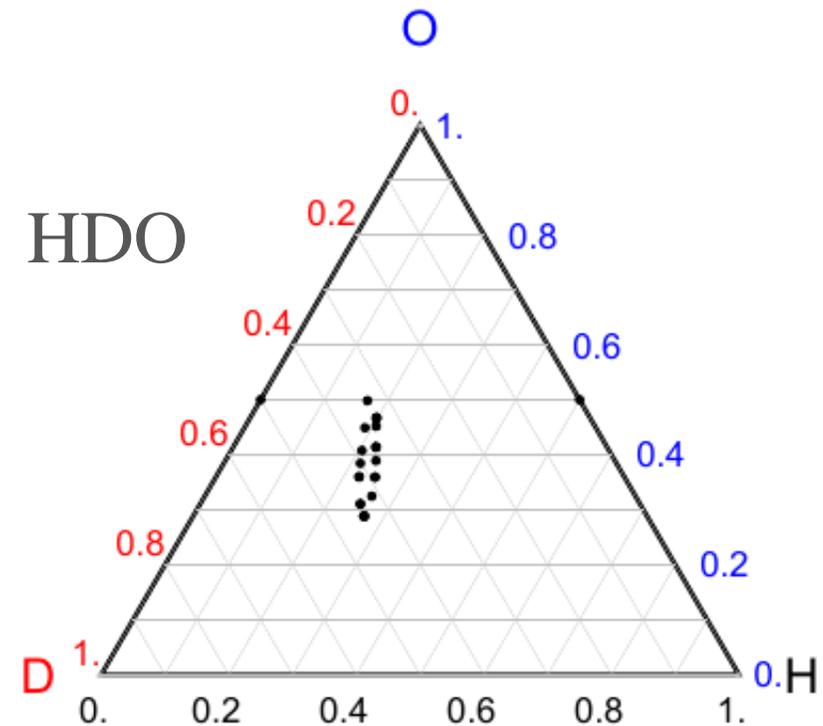
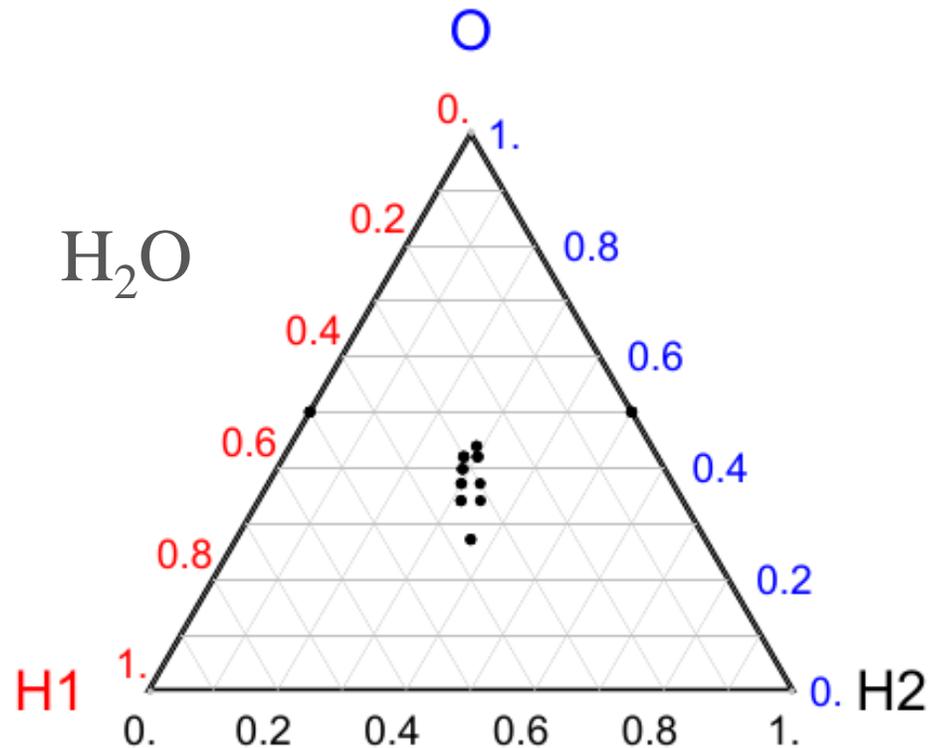
# Изменение заряда кислорода

- Фотоионизация кислорода при энергии  $E = 1000$  эВ происходит быстрее, чем для водорода
- Время действия импульса сопоставимо с характерным временем оже-эффекта
- Ввиду существования оже-эффекта количество ионов с четным зарядом в конечном распределении выше, чем с нечетным



# Диаграммы Далица для изменения зарядов всех фрагментов

- С учетом изменяющегося заряда иона кислорода становится более заметным разброс конечных импульсов фрагментов



# Заключение

- Предложена математическая модель кулоновского взрыва молекулы воды. Создана программа для решения задачи разлета трех тел с учетом изменения зарядов фрагментов под действием рентгеновского импульса. Проведены расчеты для молекул  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HDO}$ . Результаты представлены в виде диаграмм Далица. Сравнение с ожидаемыми экспериментальными данными, полученными на EuXFEL, должно показать, насколько хорошо наша простая модель позволяет описать кулоновский взрыв реальных молекул
- Представленная модель может быть развита в нескольких отношениях, например, учетом молекулярных связей, распределения атомов в молекуле по начальным скоростям, вращательных и колебательных степеней свободы

**Спасибо за внимание!**

# Список литературы

- 1. Wallner M., Eland J.H.D., Squibb R.J. et al. // Coulomb explosion of  $CD_3I$  induced by single photon deep inner-shell ionisation. Sci. Rep. 10,1246 (2020).
- 2. Piancastelli M.N., private communication.
- 3. Сивухин Д.В. // Общий курс физики. Учеб. пособие: Для вузов. В 5 т. Т.3. Электричество. — 4-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ; Изд-во МФТИ. 2004.
- 4. Собельман И.И. // Введение в теорию атомных спектров — М.:Физматгиз. 1963.
- 5. Земцов Ю.К., Бычков К.В. // Курс лекций по атомной физике.[Электронный ресурс].
- 6. Копылов Г.И. // Основы кинематики резонансов — М.: Наука. 1970.
- 7. Строковский Е.А. // Лекции по основам кинематики элементарных процессов — М.: Университетская книга. 2010.
- 8. Крупянский Ю.Ф., Лунин В.Ю., Грызлова Е.В., Балабаев Н.К., Грум-Гржимайло А.Н., Степанов А.С., Сеницын Д.О., Терешкина К.Б., Абдулнасыров Э.Г., Петрова Т.Е. // Экспериментальный образец —элемент программно-методического комплекса обработки данных по структуре биомолекулярных объектов. Свидетельство о регистрации программы 2013614677. 20 мая 2013.
- 9. Herman F. and Skillman S. // Atomic Structure Calculations. Prentice-Hall Inc., New Jersey. 1963.
- 10. Блохин М.А. // Физика рентгеновских лучей. — Изд. 2-е, перераб. — М. : Гос. изд-во технико-теорет. лит. 1957.
- 11. Парилис Э.С. // Эффект Оже. — Ташкент: Фан, 1969.
- 12. Moribayashi K. // Application of XFEL to the measurement of x-ray flux irradiating bio-molecules by using x-ray emission from hollow atoms produced from multiple x-ray absorption. J. Phys. B 41, 085602 (2008).
- 13. Ulrich J., editor // Ten Years of COLTRIMS and Reaction Microscopes. Max-Planck-Institute für Kernphysik. Heidelberg. 2004.